

מועד ב' סמסטר ב' תשס"ד

16.8.04

אוניברסיטת תל אביב

הפקולטה למדעים מדויקים

ע"ש ריימונד וברלי סקלר

כימיה פיזיקלית 2

לתלמידי שנה ב', ביה"ס ל כימיה

המרצה: פרופ' ערן רבני

משך הבחינה 3 שעות.

מותר להכניס מחברות, רשימות ומחשבוניס.

יש לענות **בפרוט** על 4 מתוך 5 השאלות הבאות.

יש להסביר ולנמק את התשובות.

1) נתונה המולקולה H_2 במצב אלקטרוני מעורר המתאים לקונפיגורציה $\sigma_g 1s \sigma_g 2s$.

(א) מהו ההמילטוניאן האלקטרוני של המולקולה בקירוב בורן-אופנהיימר? (5 נק)

(ב) כתבו את פונקציית הגל הדו-אלקטרונית כולל ספין. כמה מצבים קיימים? (7 נק)

(ג) האם המצבים הנ"ל קושרים? מדוע? (7 נק)

(ד) מה יקרה אם בתהליך אל-קרינתי המולקולה תדעך למצב אלקטרוני מעורר המתאים

לקונפיגורציה $\sigma_g 1s \sigma_u^* 1s$? (6 נק).

2) חלקיק בעל מסה m מצוי בתוך בור פוטנציאל חד ממדי מהצורה qx^4 .

(א) מהי אנרגיית מצב היסוד של החלקיק? השתמשו/י בשיטת הוריאציה עבור פונקציית

$$\text{הוריאציה } \psi(x) = e^{-\frac{1}{2}ax^2}. \quad (12 \text{ נק})$$

(ב) הראו שכאשר $x \rightarrow \infty$ פונקציית הגל במצב היסוד הנה מהצורה האסימפטוטית הבאה:

$$\psi(x) = e^{-Ax^3}. \quad \text{קבעו את } A \text{ במונחים של } m \text{ ו- } q. \quad (13 \text{ נק})$$

ניתן להשתמש באינטגרלים הבאים:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$$

3) חלקיק בעל מסה m מצוי בתוך טבעת ברדיוס a .

(א) פיתרו את משוואת שרידינגר המתאימה. (5 נק)

(ב) מכינים את החלקיק במצב $\psi(\varphi) = 1 - \sin(\varphi)$. נרמלו את פונקציית הגל ורשום/י מצב

זה כקומבינציה ליניארית של המצבים העצמיים. (7 נק)

(ג) מהו הסיכוי למציאת החלקיק בחלק העליון של הטבעת? (7 נק)

(ד) מהו ערך התצפית של האנרגיה עבור החלקיק במצב הנ"ל? (6 נק)

$$\text{ניתן להשתמש באינטגרל הבא: } \int \sin^2(\varphi) d\varphi = \frac{\varphi}{2} - \frac{1}{4} \sin(2\varphi)$$

4) אנרגיית הדיסוציאציה הנסיונית של הרדיקל $^{12}C^1H$ היא $D_0 = 3.46 eV$, אורך הקשר ברדיקל

הוא $R_e = 112 pm$ ומספר הגל המתאים למעבר ויברציוני טהור הוא $\bar{\nu}_v = 2860 cm^{-1}$.

א) מהו עומק בור הפוטנציאל (D_e) ברדיקל $^{12}C^1H$? (5 נק)

ב) מהו ערך קבוע הרוטציה B של הרדיקל $^{12}C^1H$? (5 נק)

ג) באיזה מספרי גל יופיעו בספקטרום של $^{12}C^2D$ שני המעברים הרוטציוניים הטהורים

$(J = 0 \rightarrow J = 1)$ ו- $(J = 5 \rightarrow J = 6)$? (5 נק)

ד) באיזה מספר גל יופיע בספקטרום הויברציה-רוטציה של $^{12}C^2D$ המעבר שמקורו מצב

היסוד הויברציוני-רוטציוני? (5 נק)

ה) מהו יחס העוצמות בין שני הקווים הספקטראליים המתאימים למעברים הרוטציוניים

הטהורים $(J = 0 \rightarrow J = 1)$ ו- $(J = 5 \rightarrow J = 6)$ עבור המולקולה $^{12}C^2D$ בטמפרטורה

של $T = 500 K$? (5 נק)

5) להלן נתונים מספקטרום רוטציה-ויברציה (מעבר ויברציוני $v = 0 \rightarrow v = 1$) עבור $^{12}C^{16}O$:

2150.858, 2139.427, 2131.633, 2135.548, 2154.599, ו- 2147.084.

א) שייכו המעברים לרמות הרוטציה המתאימות. (5 נק)

ב) חשבו את B_0 ו- B_1 (10 נק').

ג) חשבו את B_e ו- α_e (5 נק').

ד) חשבו את ω_e (5 נק').

מהצמחה!

$$\begin{array}{lll}
 m_e = 9.1094 \cdot 10^{-31} kg & e = 1.6022 \cdot 10^{-19} C & \hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34} J \text{ sec} \\
 4\pi\epsilon_0 = 1.1127 \cdot 10^{-10} C^2 N^{-1} m^{-2} & N = 6.0221 \cdot 10^{23} mol^{-1} & m_a = 1.6606 \cdot 10^{-27} kg \\
 c = 2.9979 \cdot 10^8 m \text{ sec}^{-1} & & k_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} JK^{-1} = 0.695 cm^{-1} K^{-1}
 \end{array}$$